

Modelo de dos zonas para lechos fijos con información asistida por CFD

Mariana T. Zambon^(a), Guillermo F. Barreto^(b), Germán D. Mazza^(a)

^(a): Departamento de Química, Facultad de Ingeniería,
Universidad Nacional del Comahue Buenos Aires 1400. Neuquén (8300). ARGENTINA

^(b): PROIRQ, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería y Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA). Universidad Nacional de La Plata.- 47 esquina 1, La Plata (1900), ARGENTINA.
E-mail: gmazza@uncoma.edu.ar

ABSTRACT

A Two-Zone Mathematical model for heat transfer in fixed beds (Two Zones Model) is proposed in this work. According to the model, the bed is divided in two zones: the first region -adjacent to the wall- plays an important role in the heat transfer process and the second one -the bulk zone- allows the heat to be transported from and to the center of the tube. An appropriate methodology for the estimation of the model parameters, based on the application of Computational Fluid-Dynamics, is developed here.

Specifically, the total heat flux at the tube wall is calculated with the aim of evaluating the heat transfer coefficient at the wall, h_w . This coefficient could be later correlated with geometrical and operating conditions in the bed. The CFD technique used, in this way, replaces well the information based on experimental work, and constitutes a useful tool for obtaining precise information dealing with the bed behavior.

In this work, the case of low-conductivity solid particles, which is strictly the analogous case of mass transfer process, is dealt with. Operation conditions of steam reforming of natural gas were adopted in calculations. The software used for CFD is Fluent 6.2.16 (Computational Fluid Dynamics Software) assisted in the mesh generation by the use of the software Gambit 2.2.30.

Results obtained for spherical particle beds are presented and compared with previous contributions reported in the literature.

Key-words: Computational Fluid-Dynamics, Fixed Bed, Two-Zone Model, Heat Transfer

RESUMEN

En este trabajo se presenta un modelo matemático para la representación de la transferencia de calor en lechos fijos denominado Modelo de Dos Zonas, en el cual se divide al lecho en una zona adyacente a la pared del tubo y una zona central. Se desarrolla una metodología para la determinación apropiada de los parámetros propios del modelo mediante la utilización de Fluidodinámica Computacional.

En esta etapa del estudio se determina el flujo de calor sobre la pared de tubo, con el fin de obtener uno de los parámetros del modelo: el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared. Posteriormente, se correlacionará con las condiciones geométricas y operativas del lecho. La CFD reemplaza, de esta forma, a la realización de experiencias específicas y se utiliza como herramienta para la generación de información de alta precisión.

Se analiza el caso de un sólido de baja conductividad, lo que corresponde por analogía al caso de transferencia de materia equivalente y se utilizan condiciones operativas correspondientes al proceso de reformado de gas natural con vapor de agua. El software utilizado es el programa Fluent 6.2.16 (Computational Fluid Dynamics Software) y la malla para el cálculo se genera mediante el programa Gambit 2.2.30.

Se presentan resultados obtenidos para lechos rellenos con partículas esféricas y se comparan los resultados obtenidos con información existente en bibliografía.

Palabras clave: Fluidodinámica Computacional, Lechos Fijos, Modelo de Dos Zonas, Transferencia de Calor.

NOMENCLATURA

G	flujo másico, $kg\ m^{-2}\ s^{-1}$
G_m	caudal másico, $kg\ s^{-1}$
h_w	coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, $W\ m^{-2}\ K^{-1}$
h_{12}	coeficiente de transferencia de calor entre las zonas 1 y 2 del MDZ, $W\ m^{-2}\ K^{-1}$
$k_{e,rc}$	conductividad efectiva radial de la zona central (zona 2) del MDZ, $W\ m^{-1}\ K^{-1}$

$$Nu_w = Nu_w = \frac{h_w d_p}{k_g}, \text{ número de Nusselt sobre la pared,}$$

Q	flujo de calor, $W\ m^{-2}$
q	caudal volumétrico de fluido, $m^3\ s^{-1}$

$$Re_p = \frac{\rho v_{sup} d_p}{\mu}, \text{ número de Reynolds en base al diámetro de partícula,}$$

T	temperatura, K
v_z	componente z de la velocidad lineal del fluido, $m\ s^{-1}$

Subíndices

0	condición del gas en la alimentación
1	zona 1 del MDZ
2	zona 2 del MDZ
c	zona central del MDZ (zona 2)
g	gas
F	seno del lecho
w	referido a la pared de la celda

Símbolos griegos

ρ	densidad del gas, $kg\ m^{-3}$
μ	viscosidad del gas, $kg\ m^{-1}\ s^{-1}$

INTRODUCCIÓN

El reactor catalítico de lecho fijo (RLF) es, probablemente, el equipo más utilizado para el procesamiento de reacciones químicas en la industria de procesos. En consecuencia, la simulación apropiada del comportamiento de estas unidades es un requerimiento permanente en la práctica industrial y en las actividades de investigación y desarrollo.

La adecuada representación de la transferencia de calor a fin de cuantificar el transporte de energía térmica en el reactor reviste fundamental importancia. No obstante, a pesar de existir numerosos estudios reportados en la bibliografía (Berto y Barreto, 1992; Nijemeisland y Dixon, 2001), no se ha presentado aun la formulación de un modelo ágil y eficiente para representar el comportamiento térmico del lecho.

Recientemente se han dedicado considerables esfuerzos basados en la utilización de la fluidodinámica computacional (CFD) a elaborar herramientas predictivas que

permitan determinar los campos de velocidad, composición y temperatura en lechos fijos (Ranade, 2002; Nijemeisland y Dixon, 2004; Guardo et al., 2006; Natarajan et al., 2005; Liu y Peng, 2005). En general, se han adoptado dos enfoques diferentes en la aplicación de la CFD a estos sistemas. En primer término, se pueden mencionar aquellos “modelos” que representan el lecho como un medio poroso con parámetros efectivos para calor y materia (“lumped parameters approach”), y hacen uso de una “viscosidad efectiva” para obtener la concordancia entre los perfiles de velocidad obtenidos por CFD y los valores experimentales (Dixon y Nijemeisland, 2001). Ello no constituye, salvo en lo estrictamente numérico, una apreciable diferenciación con los enfoques pseudo homogéneos clásicos de representación de RLF.

Alternativamente, un segundo tipo de modelos reconoce la complejidad del lecho sin simplificar su estructura. En este caso la representación geométrica y la generación de la malla constituyen aspectos de considerable dificultad en la implementación del modelo. Su resolución numérica posterior conduce a requerimientos de tiempo computacional muy elevados, lo que en conjunto permite concluir que la utilización de la CFD en la simulación microscópica de RLF es de escasa o nula factibilidad.

A pesar de lo expuesto en el párrafo precedente, la CFD constituye una valiosa herramienta para la obtención de información confiable sobre diversos aspectos del comportamiento del RLF, esencialmente en la influencia de la estructura del mismo sobre los procesos de transporte y reacción química (Calis et al., 2001; Romkers et al., 2003; Nijemeisland y Dixon, 2004).

Sobre la base descripta, el objetivo de este trabajo es mostrar cómo la técnica CFD se utiliza para generar la información requerida en la formulación de un modelo de utilización rápida y ágil (Modelo de Dos Zonas, MDZ) que ya ha sido presentado por los autores para lechos fijos, particularmente para régimen trickle-bed (Mariani et al., 2003) y también, con las consideraciones particulares pertinentes, para la fase densa de un lecho fluidizado (Mazza et al., 1997).

El énfasis de este trabajo será puesto en la metodología para la obtención de información requerida por el MDZ a partir de la CFD y, en particular, de la referida al proceso de transporte de calor en el fluido sobre la pared del lecho, constituyendo el primer paso en tal sentido.

Modelo de Dos Zonas para la representación de la transferencia de calor en reactores de lecho fijo

El Modelo de Dos Zonas puede describirse haciendo uso del esquema presentado en la Fig. 1 (Mariani et al., 2003). El lecho se divide en dos zonas, una inmediatamente adyacente a la pared del tubo (zona “1”), de espesor $d_p/2$ en el sentido de la coordenada “y”, más una zona central (zona “2”) que continúa a la anterior hacia el seno del lecho. La pared de tubo se ha identificado con la leyenda “pared” (sólo interesa la

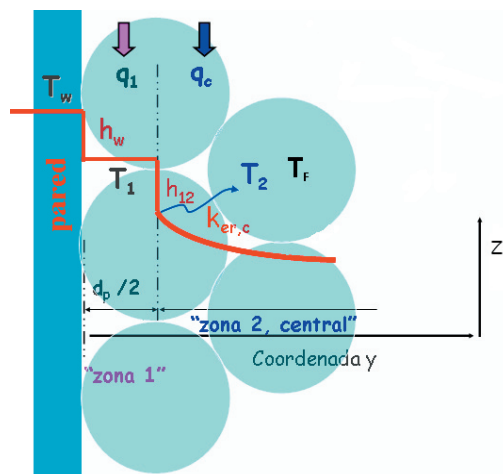


Figura 1. Esquema de los elementos que componen el MDZ.

pared izquierda, por simetría radial). La zona central se representa mediante una concepción pseudo-homogénea y continua, lo cual es consistente con el comportamiento del medio de partículas en la región alejada de la pared del tubo, caracterizada por un perfil más suave de temperatura y un menor efecto “ordenador” del relleno que en la región inmediatamente adyacente a la pared. Debe mencionarse que, si bien en la Fig. 1 se han incluido como parámetros térmicos del MDZ los coeficientes h_w y h_{12} (coeficientes de transferencia de calor sobre la pared y entre ambas zonas, respectivamente) la formulación permitiría considerar un enfoque heterogéneo, conforme a la mayor aproximación a la realidad de la estructura de lecho en esta zona (Barreto y Mazza, 1996), generada por el efecto ordenador de la pared sobre el acomodamiento de las partículas. En tal caso, si la situación física lo demanda, se tendrían campos de temperatura individuales para cada fase (gas y sólido) y el correspondiente coeficiente de transferencia de calor entre las mismas (Mazza, G, 1993). En este trabajo, la situación descrita no se considerará, por estar orientado al análisis del proceso de intercambio térmico sobre la pared y destinado a la evaluación de h_w .

En consecuencia, los parámetros térmicos que el modelo introduce son: el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w , la conductividad efectiva radial en zona 2, $k_{e,c}$, y el coeficiente de transferencia de calor entre las zonas “1” y “2”, h_{12} . Adicionalmente, aunque no es parámetro térmico, se tendrá el caudal volumétrico que circula por zona 1, q_1 .

El flujo de calor sobre la pared del tubo puede expresarse en términos del coeficiente de transferencia sobre la pared, h_w y la diferencia de temperaturas ($T_w - T_1$) como:

$$Q = h_w(T_w - T_1) \quad (1)$$

donde T_1 es la temperatura de mezclado de taza de la región 1 del MDZ.

En este trabajo se presentan resultados obtenidos para el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w , y el mismo constituye el inicio de un conjunto de estudios utilizando CFD, para la determinación completa de los parámetros involucrados.

En relación a la continuación de la determinación de los parámetros del MDZ, es importante remarcar que se debe adoptar una definición para la temperatura T_2 que corresponde a la temperatura de la zona central pero en la frontera con la zona adyacente a la pared. Para dicha temperatura puede adoptarse una concepción similar a la que definió T_1 utilizando un espesor diferente en el sentido del eje “y”. Sin embargo, dicho espesor es, en principio, un valor que puede discutirse. Sobre la frontera entre las dos regiones (“1” y “2”), el flujo de calor puede escribirse como

$$k_{e,c} \frac{\partial T_2}{\partial y} \Big|_{y=d_p/2} = h_{12} (T_2|_{y=d_p/2} - T_1) \quad (2)$$

donde aparece el coeficiente de transferencia entre las regiones y la conductividad efectiva radial en la zona central. A fin de evaluar esta última, una alternativa sería asistirse de la resolución de un modelo bidimensional en la región central y comparar los perfiles con los obtenidos en el cálculo por CFD. De esa comparación se ajustaría el valor de la conductividad efectiva en zona central. Como se ha señalado, este trabajo se restringirá a la determinación del coeficiente h_w .

Metodología

El soporte utilizado es el programa **Fluent 6.2.16** (*Computational Fluid Dynamics Software*) que se asiste del programa **Gambit 2.2.30** para la generación de la malla que regirá luego en la aplicación del método de volúmenes finitos, específicamente, en el Programa Fluent.

El estudio del sistema requiere, secuencialmente, de la adopción de esquemas estructurales (geométricos) para el lecho y de una alternativa de resolución específica por CFD.

En primer lugar, en lo referente a la estructura, se adoptó un lecho conformado por partículas esféricas de diámetro d_p , dispuestas en un arreglo rombohédrico (Fig. 2). Se utilizó una geometría conformada por placas paralelas (secciones de flujo) en lugar de un conducto circular. Esta configuración es apropiada si el radio de tubo es suficientemente mayor que el diámetro de partícula utilizado. En cuanto a la operación del lecho, este trabajo se acotará al estudio del comportamiento del fluido, lo cual corresponde, estrictamente, al caso de un sólido de baja conductividad (en rigor nula), o, por analogía, al caso equivalente de transferencia de materia. También representa estrictamente el caso de transporte convectivo dominante (altos Re , como en la situación de reformado de gas natural).

Con respecto a la resolución por CFD, la aplicación de la misma en estado estacionario puede hacerse, en principio, con el programa Fluent por dos vías diferentes que debieron analizarse separadamente y que se discuten en el apartado siguiente.

El cálculo de la temperatura de mezclado de taza, T_1 , y del caudal a través de la región 1, q_1 , se realizó a partir de las expresiones siguientes:

$$T_1 = \frac{\int_{V_1} T v_z dV}{\int_{V_1} v_z dV} \quad (3)$$

siendo V_1 el volumen de la celda unitaria, limitada por $d_p/2$ en la dirección “y”,

$$q_1 = \frac{\int_{V_1} v_z dV}{L_1} \quad (4)$$

donde L_1 es la longitud de la celda unitaria en la dirección axial (z)

En este trabajo se presentan resultados obtenidos para el coeficiente de transferencia de calor sobre la pared, h_w , y constituye el inicio de un conjunto de estudios, utilizando CFD, para la definición completa de los parámetros involucrados.

Análisis con celdas de profundidad variable (en la dirección del flujo de gas) vs. aplicación de fronteras periódicas.

Celdas de profundidad variable

El análisis con celdas de profundidad variable puede explicarse con la ayuda de la Fig. 3. Se conformó un lecho de partículas sólidas posicionadas de acuerdo al arreglo espacial mencionado entre dos paredes de temperaturas diferentes, T_{w1} y T_{w2} . A través del lecho se hizo fluir una corriente de gas (aire) que ingresó a temperatura T_{go} y caudal másico G_m . En la dirección “x”, la celda se construyó con un espesor de dos partículas.

Las figuras corresponden a dos situaciones sucesivas donde se ha incrementado el número de partículas en la dirección del flujo de gas (z) y han sido extraídas de salidas del programa Fluent. Las secciones del cuadrado en rojo (plano de salida de gas) y azul (plano de entrada) en ambas celdas de la fig. 3 son coincidentes, pero las zonas de calma de flujo difieren porque dependen de la cantidad de partículas de la celda en la dirección z. Esta modalidad requiere establecer las condiciones de frontera. Se utilizaron las siguientes:

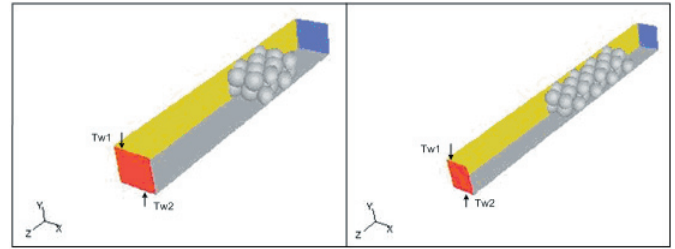


Figura 3. Visualización de celdas de profundidad variable

- Temperatura y velocidad del fluido constante en la superficie de entrada, $T = 727 \text{ K}$, $v_z = 0.75 \text{ m s}^{-1}$
- Temperatura constante en las paredes horizontales (superior e inferior), $T_w = 963 \text{ K}$
- Presión manométrica en la superficie de salida (plano en $z = L$), $P = 0$ (referida a la presión de operación $P = 2.5 \text{ MPa}$) $\Rightarrow P_{\text{absoluta}}(z=L) = 2.5 \text{ MPa}$
- En las paredes y sobre las esferas se cumple la condición de velocidad nula.

Se estudió la respuesta del sistema variando la profundidad del lecho en la dirección del flujo de gas, respetando el arreglo rombohédrico, con la expectativa de hallar que tanto las variables fluidodinámicas (velocidad de gas, caída de presión entre la entrada y la salida) como térmicas (temperatura, flujo de calor) presentaran un comportamiento que evidenciase la obtención del estado estacionario en tiempos de cómputo razonables. En todos los casos se utilizaron dos estratos de partículas en la dirección y (entre los planos de temperatura predeterminada).

Se comenzó trabajando con una profundidad de 4 partículas (en la dirección z, 16 partículas totales en la celda), incrementando la misma hasta 8 partículas en la dirección z (32 partículas totales en la celda).

La convergencia en estos casos se obtiene, luego de superadas 72 horas de cálculo y también tiempos mayores, dependiendo de la profundidad del lecho. Las condiciones operativas en el cálculo corresponden, aproximadamente, a las temperaturas y caudal másico del proceso de reformado de gas natural con vapor de agua, en el cual la transferencia de calor desempeña un rol fundamental, dada la endotermicidad global del sistema de reacciones involucrado. La Tabla I resume las condiciones utilizadas en el cálculo.

La Fig. 4 muestra los resultados de la componente z de la velocidad (v_z en la Fig. 4a) y temperatura del gas (Fig. 4b) para los cálculos sobre el sistema de 8 partículas en la dirección z. Las diferentes curvas, corresponden a los perfiles de velocidad v_z y temperatura, obtenidos para el lugar geométrico de los puntos

Tabla I. Condiciones operativas del proceso de Reformado de Gas Natural utilizadas en los cálculos

Temperatura de alimentación [K]	727
Presión de alimentación [MPa]	2.5
Temperatura de Pared [K]	963
Fluido	aire
Diámetro de partícula [cm]	1

que definen cuatro rectas en la dirección “y” perpendiculares al flujo de gas convenientemente espaciadas y seleccionadas para que correspondan a posiciones donde es esperable la periodicidad en las variables (posiciones geométricamente equivalentes). La coordenada x seleccionada fue la misma en todas las rectas.

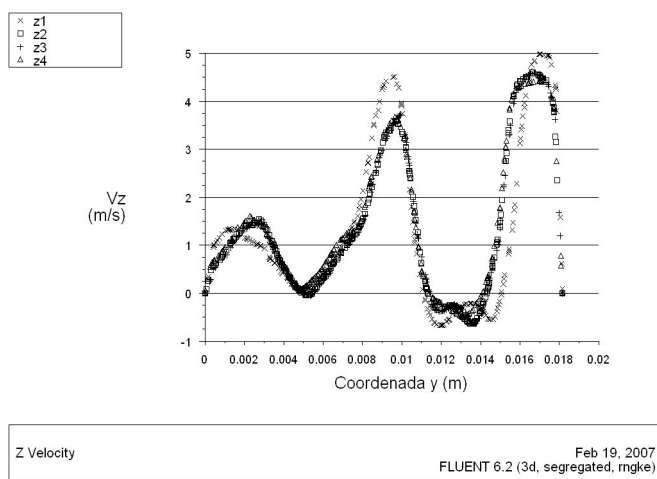


Figura 4a. Perfiles de velocidad v_z en función de la profundidad del lecho (coordenada z). La curva Z1 corresponde a la posición de entrada al lecho.

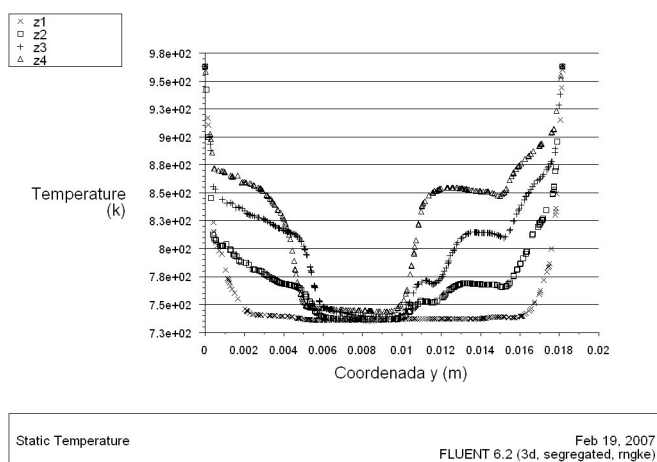


Figura 4b. Perfiles de Temperatura en función de la profundidad del lecho (coordenada z). La curva Z1 corresponde a la posición de entrada al lecho.

La forma asimétrica de las curvas (Figuras 4) responde a la posición de las esferas del segundo estrato (ubicadas conforme al arreglo romboédrico), que impide la coincidencia de los puntos de contacto sobre ambos planos de temperatura fija.

En la bibliografía se ha reportado (Guardo *et al.*, 2005) que sistemas similares (aunque en el proceso de transferencia de calor sólido-gas) alcanzan periodicidad luego de una profundidad de 2-3 partículas. En este caso, de la observación simultánea de las curvas de las figuras 4a y 4b puede concluirse que la condición de periodicidad es prácticamente alcanzada en lo que se refiere al balance de cantidad de movimiento, reflejándose en las curvas coincidentes de v_z . Sin embargo, en lo que hace al balance de calor, la condición de periodicidad no se obtiene para la cantidad de partículas mencionada. El agregado de un mayor número de partículas en el sentido z no resulta viable porque ya, en las condiciones de las Figuras 4 el tiempo de cómputo supera las 72 horas (dependiendo de la densidad de la malla). De esta manera, para las condiciones operativas representativas de los casos de interés, los resultados muestran que esta modalidad de cálculo no es viable *sin cálculo en paralelo*.

La operación del software *Fluent* requiere definir ciertas magnitudes que se mencionarán posteriormente (aspectos comunes a la segunda alternativa de cálculo).

Fronteras Periódicas (FP)

En la modalidad de fronteras periódicas (3D) el sistema de ecuaciones se resuelve por CFD en un volumen limitado por dos planos perpendiculares al eje z en los que la estructura del lecho presenta periodicidad en los valores de velocidad y temperatura (eventualmente de composición, en sistemas con cambio de concentración). Estos planos conformarán las fronteras periódicas. La utilización de FP se sustenta en detectar estructuralmente las posiciones en el lecho de partículas donde las variables deben adoptar valores periódicos y construir la celda de periodicidad consecuentemente. La condición de periodicidad para la temperatura puede expresarse, con las coordenadas definidas en la Fig. 5, como:

$$(T_{x,y,z} - T_w) = \alpha(T_{x,y,z+L_I} - T_w) \quad (5)$$

donde α es un coeficiente que se determina en la frontera de ingreso a partir de un par de valores (x_0, y_0) y no depende de x ni de y posteriormente.

Estas dos fronteras reemplazan a las condiciones iniciales y finales del enfoque precedente, y su utilización reduce notablemente el tiempo de cálculo, garantizando la obtención de la convergencia. La Fig. 5 muestra una celda de cálculo con fronteras periódicas, con tres estratos de partículas separando las “paredes” de temperatura especificada T_w . El gas fluye a través de las FP, completándose la celda con los dos planos (x-z) con la misma temperatura predeterminada T_w y otros dos

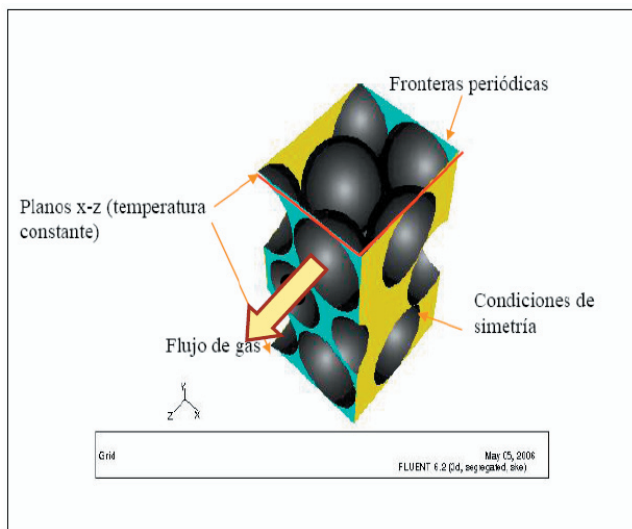


Figura 5. Celda de cálculo con aplicación de Fronteras Periódicas en el programa Fluent.

planos (z-y) para los cuales se aplican condiciones de simetría. Uno de los planos de temperatura $T_{w,s}$ es el que se utilizará para evaluar el coeficiente h_w .

La utilización de la modalidad FP impone algunas restricciones. Una de las más importantes es no permitir resolver el balance de calor con temperaturas diferentes de los planos paralelos (z-x). De tal manera, se debe trabajar con $T_{w1} = T_{w2} = T_w$ y una temperatura diferente en el fluido de entrada. Para poder "aislar" el proceso de transferencia de calor sobre una de las paredes (z-x), que representará el sistema a estudiar, y garantizar la no influencia del número de estratos de partículas que la separan de la otra pared, a la misma temperatura, sobre el coeficiente de transferencia de calor h_w , se trabajó en la forma siguiente: se analizó el comportamiento del sistema aumentando el número de estratos de partículas que se ubican entre los planos z-x de temperatura constante. Se comienza con un estrato y se incrementa dicho número de a dos estratos cada vez. El valor del coeficiente será el deseado cuando entre un resultado de la condición (k) en número de estratos, y la condición ($k+1$) no se produzca un cambio significativo en h_w . Las condiciones de cálculo ya se han listado en la Tabla I.

Otra limitación del enfoque FP es que no permite expresar las propiedades físicas del fluido en función de la temperatura (implica valores medios obligatorios). Sin embargo, las limitaciones son menos relevantes cuando se reconoce la información que se obtiene por este medio y su utilidad en relación al esfuerzo. Se utilizará en el cálculo un número impar de estratos entre los planos de temperatura T_w por razones de simetría de celda. Antes de describir el cálculo y resultados obtenidos con FP, se debe definir la malla a adoptar.

Construcción de la malla

La malla de cálculo se genera a partir del software **Gambit 2.2.30**, y debe construirse con suma precaución,

teniendo en cuenta que una malla muy cerrada permitirá obtener elevada precisión en el cálculo pero incrementará sensiblemente el tiempo de cómputo. Un aspecto crítico para la posterior utilización del programa Fluent es la determinación exacta de los puntos de contacto de las esferas que componen la celda, tanto en el mismo estrato como entre estratos adyacentes. Esta determinación se realiza con consideraciones geométricas fuera del programa Gambit y se vuelca en la celda como información externa.

Se ha adoptado como situación de referencia la malla de 843.920 volúmenes de control (malla A en la Tabla I). A partir de ella y utilizando celdas periódicas de tres estratos, se calcula el flujo total de calor sobre la pared, Q_{REF} , que se utilizará como criterio para la aceptación de mallas de menor densidad (B-E), a fin de realizar las corridas definitivas. La malla se construye a través del ingreso de información al software Gambit, esencialmente a través de la función de tamaño (size function), que maneja la dimensión de los elementos en que se divide el volumen para su tratamiento numérico posterior. La función de tamaño varía de acuerdo a tres parámetros: el tamaño inicial, que determina el tamaño de partida para el mallado en los puntos de la geometría que requieren mallado más cerrado (start size), la velocidad de crecimiento (growth rate) que determina cómo los elementos van aumentando en su tamaño a partir de la célula inicial, y el tamaño límite (size limit) que impedirá la construcción de elementos de volumen de mayor tamaño (Fluent, Inc. *Gambit Modeling Guide*, 2004). Los valores de los parámetros adoptados en nuestro caso se muestran en la Tabla II. Luego de realizar el cálculo de la situación de referencia sobre la malla A, se ensayaron mallas de menor densidad (B-E en la Tabla II) y se evaluó en cada caso el valor del flujo de calor Q . La Tabla II resume los resultados, incluyendo el error relativo a Q_{REF} obtenido en cada caso.

En la Tabla II se observa que el error aumenta al utilizar mallas menos densas e incluso cambia de signo, por razones inherentes al método numérico. Se adoptó como malla de trabajo la identificada con B, que permite obtener el flujo de calor con un error del orden del 1%, cuya apariencia se aprecia en la Fig. 6, (se muestra un sector de la celda de siete estratos). En todos los casos siguientes, con número creciente de estratos,

Tabla II. Validación de la malla a utilizar. Cálculos en celdas de 3 estratos, $T_w = 963\text{ K}$, $T_{g0} = 727\text{ K}$, $G = 4.203\text{ kg m}^{-2}\text{ s}^{-1}$, $Re_p = 1000$, fluido: aire.

Malla	Número de elementos totales	Parámetros característicos			Q [W m ⁻²]	Error %
		Start size	Growth rate	Size limit		
A	843920	0.00017	1.15	0.0013	$Q_{REF} = 16092.1$	
B	613480	0.00017	1.15	0.0015	15938.3	0.95
C	458966	0.00018	1.15	0.00175	15783.1	1.92
D	388439	0.00018	1.15	0.0020	15746.8	2.14
E	313971	0.00020	1.15	0.0030	16289.4	-1.23

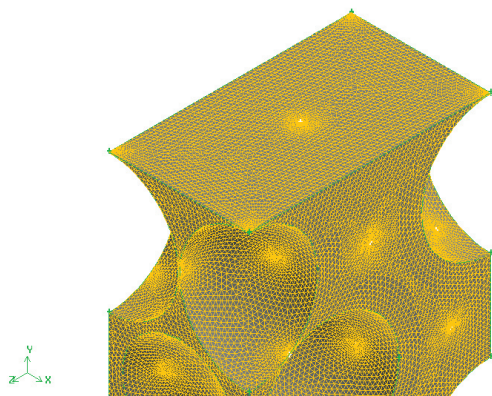


Figura 6. Malla de densidad B, generada con el software Gambit

se utilizaron los parámetros característicos de la condición B en la generación de mallas.

Evaluación de h_w . Determinación del número de estratos necesario

Siguiendo el procedimiento descrito en la sección Fronteras Periódicas, se construyeron celdas de 1, 3, 5, 7 y 9 estratos ubicados entre las “paredes” de temperatura T_w . Con las condiciones de caudal y temperaturas T_w y T_{g0} se obtuvo por CFD el valor del flujo de calor sobre la pared de interés, Q , el valor de la temperatura T_1 (ec. 3) y el caudal volumétrico q_1 (ec. 4). El coeficiente de transferencia de calor sobre la pared se evaluó a partir de la ecuación (1) como $h_w = Q / (T_w - T_1)$.

Los cálculos se realizaron utilizando el método segregado de resolución (programa Fluent), que consiste en resolver en forma secuencial las ecuaciones de cantidad de movimiento y turbulencia y luego el balance de calor, con simple precisión en todos los casos. La utilización eventual de doble precisión no se ha adoptado aun y no resulta necesaria. Adicionalmente, ensayos preliminares evidenciaron un considerable aumento del tiempo de cómputo.

El cálculo del flujo, en este caso, corresponde a la condición de turbulento, y, en consecuencia, debe utilizarse un modelo de turbulencia en el tratamiento de las ecuaciones de cantidad de movimiento. El software Fluent permite seleccionar el modelo de turbulencia entre diferentes opciones existentes para el mismo. La utilización de estos modelos en lechos rellenos ha sido objeto de algunos estudios en la bibliografía (Guardo et al., 2004, 2005, 2006). En este trabajo se utilizó el modelo $k-\varepsilon$, con función de pared estándar, necesaria para corregir el comportamiento del modelo $k-\varepsilon$ en la región cercana a las paredes de tubo, dado que los modelos de turbulencia son generados para regiones *bulk* del lecho. se adoptaron los valores $T_w = 963$ K, $T_{g0} = 727$ K, $Re_p = 1000$ (régimen turbulento), $G = 4.203$ kg m⁻² s⁻¹.

En cuanto al método de discretización que utiliza el programa Fluent, las corridas se iniciaron con un esquema de primer orden hasta obtener un valor pequeño de los residuos. A partir

Número de estratos	q_1 [m ³ s ⁻¹]	T_1 [K]	Q [W m ⁻²]	h_w [W m ⁻² K ⁻¹]	Δh (%) (ec.5)
1	3.92E-06	750.00	84634.30	397.35	
3	9.91E-06	932.08	15938.30	515.56	-29.75
5	1.97E-05	946.91	8588.01	533.74	-3.53
7	2.93E-05	951.6	6123.54	537.02	-0.61
9	No convergencia				

Tabla III. Determinación del número de estratos para el cálculo de h_w , $T_w = 963$ K, $T_{g0} = 727$ K, $G = 4.203$ kg m⁻² s⁻¹, $Re_p = 1000$

de ese punto se reinicia el cálculo cambiando a la utilización de un esquema de segundo orden. De esta manera, se lograba disminuir el tiempo de cálculo y garantizar la convergencia del mismo. La Tabla III resume los resultados obtenidos.

La diferencia (Δh %) que se reporta en la Tabla III es la que se obtiene al pasar de calcular el coeficiente h_w en un sistema con k estratos a un sistema con $k+2$ estratos, definido como

$$\Delta h (\%) = \frac{h_{w(k)} - h_{w(k+2)}}{h_{w(k)}} \quad (6)$$

siendo $k = 1, 3, 5, 7$, dado que se trabajó con incrementos impares del número de estratos.

De los resultados presentados en la Tabla III vemos que hasta alcanzar el número de 5, la modificación del número de estratos no permite lograr “aislar” la transferencia de calor sobre la pared a T_w del efecto del número de estratos, observándose un cambio considerable en el valor del coeficiente de transferencia de calor y en la temperatura de la región adyacente a la pared. Al pasar de 5 a 7 estratos el error % en h_w es de 0.61%, valor que resulta sumamente razonable. El tiempo de cómputo para 7 estratos es de 46 horas. Para 9 estratos la convergencia se ve dificultada y el tiempo de cómputo excede las 72 horas.

En consecuencia, se adoptó la celda de 7 estratos con malla tipo B (Tabla II) para la obtención de h_w .

Es de interés resaltar la importancia que cobra el caudal q_1 , caudal de la región adyacente a la pared. Cuando ambas paredes se separan por un estrato, no es posible visualizar la importancia, que se ve evidenciada y reforzada a medida que el número de estratos crece, hasta su valor en la conformación adoptada de siete estratos.

Resultados y Discusión

De acuerdo a los procedimientos mencionados en secciones precedentes se obtuvo una metodología de cálculo para el coeficiente de transferencia de calor en la pared, h_w , en lechos

fijos. Como se ha mencionado, las condiciones de cálculo en este trabajo se centran en considerar sólidos de muy baja conductividad, con lo que la situación en sí es estrictamente la análoga para transferencia de materia.

Se realizaron diferentes corridas del programa Fluent con la celda de siete estratos adoptada, variando el número de Reynolds, entre 100 y 2000, con lo cual se obtuvo información para regímenes que pasan desde la condición laminar ($Re = 100-300$) a régimen turbulento.

Las Figuras 7 muestran los perfiles de distribución de temperatura en una única celda periódica (Fig. 7a) y de flujo de calor correspondiente a la superficie de temperatura T_w (Fig. 7b) para una simulación con $Re_p = 1000$. En la Figura 7b se han combinado dieciséis celdas periódicas (cuatro en la dirección x y cuatro en la dirección z) para apreciar la distribución del flujo de calor en un área mayor de la pared a T_w .

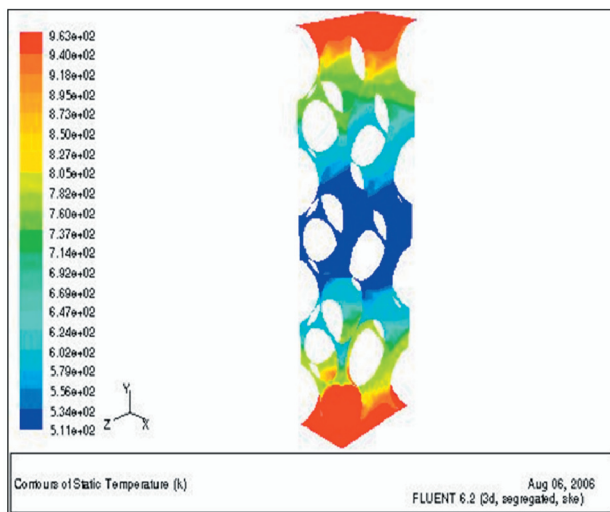


Figura 7a. Perfil de temperatura sobre las fronteras de la celda.

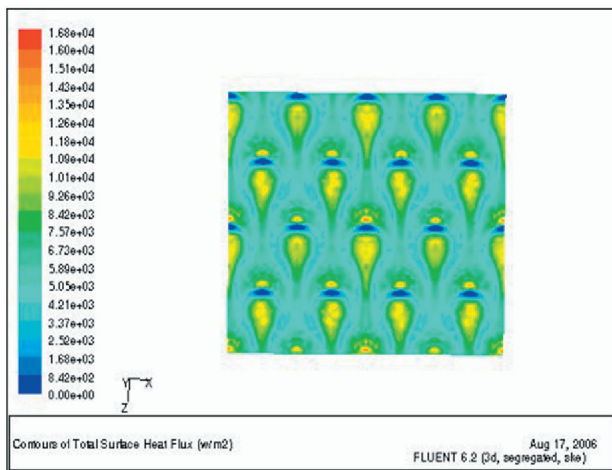


Figura 7b. Flujo de calor sobre la pared base a T_w de celdas unidas en las direcciones x, z en Wm^{-2}

La distribución de temperatura es la esperada para un sistema con ambas paredes a la misma temperatura y una corriente de fluido de temperatura menor. Como dato de interés, el mapa de flujo de calor es similar en presentar la forma de herradura a otros trabajos reportados en la bibliografía (Nijemeisland y Dixon, 2004), para las regiones de mayor espesor de gas entre la pared y la partícula. En la Figura 7b la corriente de gas fluye en el sentido z, que se aprecia en el plano del gráfico como un sentido descendente desde la parte superior del mismo. Al bifurcarse por encontrar una partícula esférica en su trayectoria, genera, luego de la misma, una región estanca en la que el flujo de calor disminuye ostensiblemente.

Los resultados, para distintos números de Reynolds, se muestran en la Fig. 8 en formadel correspondiente número de Nusselt, Nu_w , (Wakao y Kaguei, 1982) conjuntamente con resultados reportados por otros autores, obtenidos a partir de diferentes expresiones predictivas (Dixon, A. y D. Cresswell, 1979; Li, C. y B. Finlayson, 1977; Olbrich, W. y O. Potter, 1972; Guardo *et al.*, 2005).

Puede apreciarse una razonable concordancia para las condiciones analizadas. Los resultados obtenidos se acercan a la ecuación empírica propuesta por Olbrich y Potter (1972) y se ajustan mejor a los obtenidos por Guardo *et al.* (2005) utilizando el mismo modelo de turbulencia (Standard k-e) que se utilizó en este trabajo y el modelo Spalart-Allmaras. A partir de los resultados obtenidos, puede considerarse que la metodología propuesta permite obtener adecuadamente el valor del coeficiente de transferencia de calor en la pared para las condiciones analizadas.

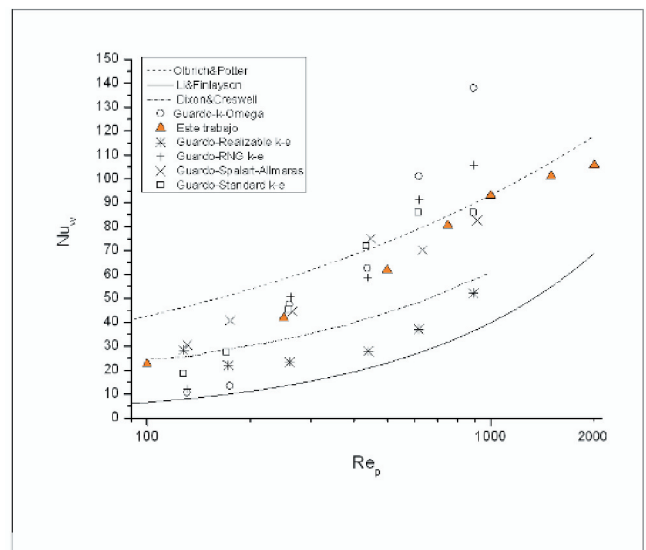


Figura 8. Nu_w Vs. Re_p evaluados según distintos modelos y correlaciones.

Conclusiones

Se ha propuesto utilizar la técnica de fluidodinámica computacional, a través del soporte Fluent-Gambit como metodología de obtención de información necesaria para la construcción de un modelo ágil y rápido destinado a la simulación de la transferencia de calor en lechos fijos.

El trabajo muestra que la utilización de una simulación microscópica (directa) del reactor de lecho fijo mediante CFD resulta altamente inconveniente, fundamentalmente derivada de la complejidad estructural del mismo y su directa incidencia en la generación de las mallas de cálculo y posteriormente en la convergencia numérica.

De los parámetros que involucra el modelo de dos zonas propuesto, en este trabajo se ha abordado el estudio del que corresponde a la transferencia de calor sobre la pared, h_w . Se estudió la incidencia de la densidad de malla y se adoptó la de menor densidad compatible con un error aceptable del 1% en el cálculo del flujo de calor sobre la pared.

Trabajando con una celda de temperatura constante en las "paredes-frontera" se estudió la incidencia del número de estratos en el fenómeno de interés sobre la pared de referencia, determinándose que una separación de 7 capas de partículas, trabajando con fronteras periódicas en CFD permite evaluar apropiadamente el coeficiente h_w en la pared analizada sin influencia de los estratos que la separan de la otra pared. Adicionalmente, se han determinado los valores numéricos del parámetro fluidodinámico q_1 .

Para la situación de sólido poco conductor, los resultados obtenidos en régimen laminar y turbulento concuerdan apropiadamente con resultados existentes en bibliografía, tanto a partir de expresiones predictivas como de aplicación de CFD a sistemas equivalentes reportadas por otros autores. Ello permite asegurar que el procedimiento es válido y sumamente útil para la obtención de una simulación rápida de un lecho fijo con el MDZ como herramienta y la CFD como instrumento soporte para la obtención de información. Los estudios podrán, posteriormente, conducir a la generación de expresiones predictivas de los parámetros térmicos netamente basadas en la información de la CFD.

Agradecimientos

El presente trabajo se realizó con el financiamiento de la Universidad Nacional del Comahue y de la Universidad Nacional de La Plata de la República Argentina.

GFB y GDM son miembros de la Carrera del Investigador Científico y Tecnológico del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas -CONICET- de la República Argentina.

Referencias bibliográficas

Barreto, G. F. and G. D. Mazza, "Modelling heat transfer between bubbling fluidized beds and immersed surfaces", *Trends in Chemical Engineering*, 1996, **3**, pp. 81-101

Berto, C. A. and Barreto, G., "The relevance of overall heat transfer coefficients in the simulation of catalytic fixed bed reactors with the heterogeneous one-dimensional model", *Appl. Math. Modeling*, 1992, **16**, 250-533.

Calis, H. P. A., Nijenhuis, J., Paikert, B. C., Dautzenberg, F. M. and C. M. van den Bleek, "CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing" *Chem. Eng. Sci.*, 2001, **56**, 1713-1720.

Dixon, A. and Cresswell, D., "Theoretical prediction of effective heat transfer parameters in packed beds". *AIChE J.*, 1979, **25**, 663-676.

Dixon, A.G., Nijemeisland, M. and E. H. Stitt, "CFD Study of Heat Transfer near and at the Wall of a Fixed Bed Reactor Tube - Effect of Wall Conduction", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005, **44**, 6342-6353

Fluent, Inc. *Gambit 2.2.30*, "Modeling Guide", 2004.

Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F. and E. Egusquiza, "CFD flow and heat transfer in nonregular packings for fixed bed equipment design", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, **43**, 7049-7056.

Guardo, A., Coussirat, M., Larrayoz, M. A., Recasens, F. and E. Egusquiza, "Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds", *Chem. Eng. Sci.*, 2005, **60**, 1733-1742.

Guardo, A., Coussirat, M., Recasens, F., Larrayoz, M. A., and X. Escaler, "CFD study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: convective heat transfer at low and high pressure", *Chem. Eng. Sci.*, 2006, **61**, 4341-4353.

Li, C. and B.A. Finlayson, "Heat transfer in packed beds—a reevaluation", *Chem. Eng. Sci.*, 1977, **32**, 1055-1066.

Liu S. and M. Peng, "Verification of mass transfer simulation with CFD using highly accurate solutions", *Computers and Electronics in Agriculture*, **49** (2005) 309-314.

Mariani N., Mazza, G., Martínez O., Cukierman, A. and Barreto, G., "On the Influence of Liquid Distribution on Heat Transfer Parameters in Trickle Bed Systems", *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2003, **81**, 814-820.

Mazza, G., "Análisis de la Transferencia de Calor entre un Lecho Fluidizado y Superficies Sumergidas", *Tesis Doctoral*, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina, 1993.

Mazza, G. D., Mariani, N. J. and G. F. Barreto, "Evaluation of overall heat transfer rates between bubbling fluidized beds and immersed surfaces", *Chem. Eng. Comm.*, 1997, **162**, 125-149.

Natarajan S., Zhang C. and C. Briens, "Numerical simulations and experimental verification of gas flow through packed beds", *Powder Technology* **152** (2005) 31 – 40.

Nijemeisland, M. and A.G Dixon, "Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed", *Chem. Eng. J.*, 2001, **82**, 231-246.

Nijemeisland, M. and A.G. Dixon, "CFD Study of Fluid Flow and Wall Heat Transfer in a Fixed Bed of Spheres", *AIChE J.*, 2004, **50**, 5, 906-921.

Olbrich, W. and O. Potter, "Mass transfer from the wall in small diameter packed beds", *Chem. Eng. Sci.*, 1972, **27**, 1733-1743.

Ranade, V., "Computational Flow Modeling for Chemical Reactor Engineering", Academic Press, New York, 2002.

Romkers S., Dautzenberg F., Van den Bleek C. and H. Calis, "CFD modeling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio", *Chem. Eng. J.*, 2003, **96**, 3-13.

Wakao, N. and S. Kaguei, "Heat and Mass Transfer in Packed Beds", Gordon and Breach Science Publishers, London, 1982.